

کالیبره کردن خودکار مدل آبهای زیر زمینی با استفاده از بهینه‌یابی مقید

حمید رضا غفوری^{۱*}، بهرام بری^۲

۱- دانشیار گروه عمران، دانشکده مهندسی، دانشگاه شهید چمران اهواز

۲- دانشجوی کارشناسی ارشد گروه عمران، دانشکده مهندسی، دانشگاه شهید چمران اهواز

* دانشگاه شهید چمران اهواز، دانشکده مهندسی

ghafouri_h@scu.ac.ir

چکیده- یکی از روشهایی که در سالیان اخیر به طرز مؤثری برای کالیبره کردن خودکار مدل آبهای زیرزمینی به کار گرفته شده، استفاده از روشهای مختلف بهینه‌یابی است. مقاله حاضر تلاشی دیگر در همین زمینه است که در طی آن به تشریح مدلی رایانه‌ای با استفاده از روشهای بهینه‌یابی پرداخته می‌شود. در این مدل برای حل معادلات جریان غیر ماندگار آب زیرزمینی از روش عددی اجزای محدود استفاده شده و برای حل مسأله بهینه‌یابی ابتدا از روش بسط یافته لاگرائز برای تبدیل مسأله مقید به نامقید و سپس از روش دیویدون-فلچر-پاول (DFP) برای حل مسأله بهینه‌یابی نامقید استفاده شده است. توانمندیهای مدل تهیه شده با ارائه یک مثال نشان داده شده که حاکی از عملکرد رضایت‌بخش مدل و نیز برخی محدودیتهای آن است.

کلید واژگان: آبهای زیر زمینی، مدل‌سازی، کالیبره خودکار، بهینه‌یابی.

۱- مقدمه

آن را بسیار کوتاهتر نماید. در سالهای اخیر تغییرات مهمی در درک اهمیت انجام خودکار کالیبره کردن مدل آبهای زیرزمینی مشاهده می‌شود. هر روز بر تعداد کاربرانی که نمی‌خواهند صرفاً به روش زمان‌بر و پرهزینه آزمون و خطا تکیه کنند افزوده می‌شود. این کاربران به استفاده از روشهایی نظام‌مند (سیستماتیک) برای کالیبره کردن علاقه بیشتری نشان می‌دهند. استفاده از روشهای ریاضی مانند روش برازش غیرخطی برای "حل معکوس معادلات حاکم و تعیین پارامترهای مورد نظر از جمله اولین روشهایی بود که به این منظور به کار گرفته شد، به‌عنوان مثال (Poeter 1997,1999) & Hill ضمن تشریح مفصل و دسته‌بندی برخی از این روشها مدلی را به نام UCODE پایه‌ریزی کردند که بر مبنای

مدلهای کامپیوتری امروز به‌صورت گسترده‌ای برای مدل‌سازی و حل مسائل مرتبط با آبهای زیرزمینی به کار می‌روند. کالیبره کردن این مدل‌ها، اولین گام و یکی از مشکل‌ترین مراحل در هر پروژه مدل‌سازی است. این کار معمولاً بر اساس اطلاعات میدانی که از آزمایشهای صحرائی به دست می‌آیند و با آزمون و خطای فراوان صورت می‌گیرد. از آنجا که این اطلاعات اغلب با خطاهای اندازه‌گیری همراه بوده و چندان دقیق نیستند، کالیبره کردن مدل معمولاً کاری بسیار وقت‌گیر و طاقت فرسا است که تا حد زیادی به دانش و تجربه کاربر بستگی دارد. به همین دلیل استفاده از کالیبره کردن خودکار می‌تواند کار مدل‌سازی را آسان‌تر و زمان انجام

برازش غیرخطی حداقل مربعات^۱ توسعه داده شده بود. همچنین بر اساس همین دسته از روشها (1984) Hoeksema et al.، Xiang et al. (1993) و (1995) RamaRoa et al. مدل‌های ریاضی دیگری را ارائه کردند. شاید بتوان گفت که مشهورترین مدل رایانه‌ای که بر این اساس تهیه شده مدل MODFLOW است که توسط Hill (1992) ارائه شده است.

دسته‌ای دیگر از روشهایی که برای کالیبره کردن خودکار مدل آبهای زیر زمینی می‌تواند به کار گرفته شود، استفاده از الگوریتم‌های بهینه‌سازی است که در سالهای اخیر مورد توجه جدی محققین در سراسر دنیا قرار گرفته و براساس آن مدل‌های مختلفی ارائه شده است. از مهم‌ترین کارهایی که در این زمینه می‌توان به آنها اشاره کرد، (Yeh 1986)، (Carrera 1988)، (Carrera & Neuman 1986)، (Peck et al. 1988) و (Olsthoorn 1995) است. در همه این تحقیقات گونه‌های مختلفی از روش عمومی گوس-نیوتن به کار گرفته شده است. مدل‌های مشهوری نظیر (Doherty; 1994) MODINV و (Doherty, 1990) PEST نیز بر همین اساس توسعه یافته است. این مدل‌ها می‌توانند تعداد زیادی از پارامترهای غیردقیق در شبیه‌سازی مورد نظر را به خوبی کالیبره کنند. البته بر خلاف تصور، کار با چنین نرم‌افزارهایی نیز به مهارت خاص نیاز دارد زیرا در این گونه مدل‌ها دستیابی به جوابهای غیرواقعی که به خوبی مدل را نیز کالیبره کنند دور از انتظار نیست. بنابراین کاربر باید به تمامی محدودیت‌های فیزیکی مسئله تسلط و شناسایی داشته باشد تا بتواند با تکیه بر اطلاعات خود و قضاوت مهندسی، جواب درست را از نادرست تشخیص دهد. علت اصلی پیدایش جوابهای غلط در چنین مدل‌هایی آن است که روشهای بهینه‌سازی به کار رفته در آنها، بر روشهای جستجوی محلی استوار است. بنابراین ممکن است برنامه بهینه‌سازی به جای یافتن جواب بهینه کلی در

دام بهینه موضعی گرفتار شود که در این صورت جواب نادرستی را نتیجه خواهد داد. در چنین حالاتی تشخیص نادرستی جواب به دست آمده به سادگی امکان پذیر نیست. Solomatine (1998, 1999) این مسأله را به تفصیل بررسی کرد و نتیجه گرفت که روشهایی نظیر الگوریتم ژنتیک^۲ یا سرد شدن تدریجی شبیه‌سازی شده^۳ که بر مبنای جستجوی فراگیر استوار هستند و پیشتر نیز توسط برخی محققان مورد استفاده قرار گرفته بودند، به این منظور مناسب‌تر هستند (Solomatine et. al., 1999) و (Dougherty et.al., 1991). وی بعداً بر همین اساس نرم‌افزاری را با نام GLOBE عرضه کرد و مدعی شد که این برنامه در دام بهینه‌های موضعی گرفتار نمی‌شود. ایشان در مقاله‌ای نتایج حاصل از مدل خود را برای دو روش متفاوت و برای تعداد مختلف پارامترهای کالیبره شونده ارائه کرد و نشان داد که این دسته از روشها تا چه حد می‌توانند در کالیبره کردن خودکار مدل آبهای زیرزمینی مفید واقع شوند (Solomatine, 1999).

مقاله‌های منتشر شده در سالهای اخیر نشانگر آن است که در حال حاضر تحقیقات در این زمینه، بر روی سه محور اساسی یعنی معرفی انواع مختلف توابع خطا، استفاده از انواع مختلف روشهای بهینه‌سازی برای کمینه سازی خطا و بالاخره بر تحلیل حساسیت پارامتری تمرکز یافته است. (Zaadnoordijk et. al., 1997, Catliffe, 2002, Sonnenborg et.al., 2003).

تحقیق حاضر تلاشی دیگر در این زمینه است که بر پایه روشهای بهینه‌یابی مقید و حل اجزای محدود معادلات حاکم استوار است. استفاده از روشی کارآمد و سریع را می‌توان از وجوه تمایز این تحقیق نسبت به تحقیقات قبلی برشمرد.

در قسمتهای بعدی مقاله ابتدا فرمول‌بندی ریاضی مدل کامپیوتری آبهای زیرزمینی ارائه شده و پارامترهای تأثیر گذار بر آن -که مبنای کالیبره کردن است- تشریح می‌شود. سپس روش به کار گرفته شده در این تحقیق

2. Genetic Algorithm
3. Simulated Annealing

1. Nonlinear Least Squares Regression

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial h^2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial h^2}{\partial y} \right) = 0 \quad (3)$$

این شکل از معادله فوق با فرض $h^2 = u$ بدلیل ثابت بودن ضرایب k_x و k_y بدون آزمون و خطا قابل حل است.

۲-۱- شرایط مرزی

به طور کلی شرایط مرزی برای معادله حاکم بر جریان آب زیرزمینی در محیط متخلخل به سه شکل زیر است:

الف- مرز با ارتفاع هیدرولیکی معلوم که در آن ارتفاع هیدرولیکی در قسمتی از مرز در زمانهای متفاوت مقداری معلوم و شکل ریاضی آن به صورت زیر است:

$$H(x, y, z, t) = H_1 \quad (4)$$

ب- مرز غیر قابل نفوذ که در آن گرادین هیدرولیکی در جهت عمود بر مرز برابر صفر است:

$$\frac{\partial H}{\partial \eta} = 0 \quad (5)$$

η راستای بردار یکه عمود بر مرز است.

ج- مرز نیمه نفوذپذیر، که گاهی منبع تغذیه برای سفره و گاهی محل تخلیه آن است. فرم ریاضی این نوع شرط مرزی به شکل زیر است:

$$K \frac{\partial H}{\partial \eta} = q \quad (6)$$

q دبی عمود بر مرز در واحد طول مرز است.

شرایط مرزی فوق همراه با معادله (۱) دستگاه معادلات حاکم را در حل مسائل جریان آب زیرزمینی در محیط متخلخل تشکیل می دهند. در ادامه، شکل گسسته این معادلات که با استفاده از روش اجزای محدود به دست می آیند، ارائه شده است.

۲-۲- گسسته سازی معادلات حاکم به روش

اجزای محدود

از آنجا که توضیح کامل این روش، خارج از حوصله این نوشتار است، در اینجا از ذکر جزئیات خودداری کرده و فقط شکل نهایی گسسته شده روابط بیان می شود. (برای

برای کالیبره کردن خودکار توضیح داده می شود.

۲- معادلات حاکم بر جریان آب زیرزمینی

چنانچه ضرایب نفوذپذیری آبخوان را در جهتهای x و y به ترتیب با k_x و k_y و ضریب ذخیره ویژه سفره را با S_s نشان دهیم، معادله حاکم بر جریان آب زیرزمینی در حالت دو بعدی که از ترکیب قانون داری و قانون بقای جرم به دست می آید به شکل زیر است:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(T_x \frac{\partial H}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T_y \frac{\partial H}{\partial y} \right) = S \frac{\partial H}{\partial t} + Q \quad (1)$$

که در آن $T_y = K_y \cdot b$ و $T_x = K_x \cdot b$ به ترتیب ضرایب انتقال آبخوان در جهات x و y و $S = S_s \cdot b$ ضریب ذخیره آبخوان است. b ضخامت سفره و $H = (p/gh) + z = h + z$ ارتفاع هیدرولیکی کلی در هر نقطه از سفره است. h ارتفاع نظیر فشار p در هر نقطه از آبخوان و Q نشان دهنده حجم آب خارج یا وارد شده به سفره از طریق چشمه یا چاه است.

رابطه (۱) رابطه کلی جریان در سفره های محصور در حالت دو بعدی است که با در نظر گرفتن فرضیات دوپوئی به دست آمده است. رابطه مربوط به سفره های غیر محصور (آزاد) نیز شباهت زیادی به رابطه ارائه شده برای سفره های محصور دارد، با این تفاوت که در سفره های آزاد، اولاً ضریب ذخیره برابر آبدهی مخصوص $S = S_y$ است و ثانیاً ضرایب $T_x = k_x \cdot h$ و $T_y = k_y \cdot h$ خود به مقدار ارتفاع (h) وابسته اند، بنابراین در این سفره ها علیرغم ثابت بودن هندسه مسئله در پلان، به دلیل غیر خطی بودن ضرایب، معادله فقط با تکرار قابل حل است.

رابطه (۱) با فرض افقی بودن سنگ بستر کف سفره، ($z=0$) و $H=h$ به معادله زیر تبدیل می شود:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \cdot h \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \cdot h \frac{\partial h}{\partial y} \right) = s \frac{\partial h}{\partial t} + Q \quad (2)$$

با فرض جریان دائمی ($\frac{\partial h}{\partial t} = 0$) و با توجه به اینکه

$$h \frac{\partial h}{\partial x} = \frac{1}{2} \frac{\partial (h^2)}{\partial x}$$

جایگزینی در رابطه فوق خواهیم داشت:

قرار گرفته است. برای مطالعه جزئیات بیشتر در این زمینه خواننده علاقمند به منبع مذکور ارجاع داده می شود.

۳- تشریح مسأله کالیبره کردن خودکار

فرض می کنیم برای سفره آب زیرزمینی مقادیر ضرائب نفوذپذیری و ذخیره سفره و شرایط مرزی و اولیه آن بر اساس اطلاعات میدانی مشخص بوده و هدف، به دست آوردن h ارتفاع هیدرولیکی) و مقایسه این h ها با مقادیر h واقعی باشد. برای این منظور، ابتدا معادلات حاکم را با استفاده از یکی از روشهای عددی مانند روش اجزای محدود حل کرده و با اعمال شرایط مرزی و اولیه و با استفاده از ضرائب نفوذپذیری و ذخیره سفره، ارتفاع هیدرولیکی هر نقطه از سفره به دست می آید. مقادیر به دست آمده از این مدل کامپیوتری با h_c (ارتفاع هیدرولیکی محاسباتی) و برای هر گره با h_{ci} (i شماره گره می باشد) نشان داده می شود.

اگر ضرائب نفوذپذیری و ذخیره سفره که در مدل استفاده می شوند با مقادیر واقعی اختلاف داشته باشند، h_{ci} های به دست آمده از مدل نیز با مقادیر واقعی ارتفاع هیدرولیکی که با h_{oi} نشان داده شده، اختلاف خواهند داشت. برای آنکه مقادیر واقعی ضرائب نفوذپذیری و ضریب ذخیره سفره مشخص و مدل کالیبره شود از این ایده استفاده شده که تابع خطایی که مجموع اختلافهای h_{ci} ها و h_{oi} ها را نشان می دهد، به صورت زیر تعریف می شود:

$$f = (h_{o1} - h_{c1})^2 + (h_{o2} - h_{c2})^2 + \dots + (h_{on} - h_{cn})^2 \quad (12)$$

و یا:

$$f = \sum_{i=1}^n (h_{oi} - h_{ci})^2 \quad (13)$$

اگر بتوان ضرائب نفوذپذیری و ذخیره سفره را بگونه ای به دست آورد که تابع خطای f به حداقل خود برسد، در این صورت اختلاف h_{ci} ها و h_{oi} ها نیز به حداقل رسیده و h_{ci} ها به مقادیر واقعی نزدیک می شوند.

مشخص است که برای آنکه تابع خطای f به حداقل برسد،

دیدن جزئیات روش به (Wang et al., 1992) رجوع شود). اگر فرض کنیم Δt اندازه گام زمانی، $\{H\}^{t+\Delta t}$ بردار ارتفاعات هیدرولیکی مجهول در نقاط گرهی شبکه محاسباتی در زمان $t + \Delta t$ و $\{H\}^t$ بردار ارتفاعات هیدرولیکی معلوم در زمان t باشد، آنگاه شکل گسسته رابطه (۱) را به صورت زیر می توان نوشت:

$$[A] \{H\}^{t+\Delta t} = [B] \{H\}^t + \{f\} \quad (7)$$

که در آن:

$$[A] = [G] + \frac{1}{\Delta t} [P] \quad (8)$$

$$[B] = \frac{1}{\Delta t} [P] - q \quad (9)$$

$[G]$ و $[P]$ ماتریسهای مربعی می باشند که تعداد سطر و ستون هر یک برابر با تعداد گره های شبکه محاسباتی در کل دامنه بوده و مؤلفه های هر یک به صورت زیر به دست می آید:

$$G_{(L,i)}^e = \iiint_V (K_x \frac{\partial N_i^e}{\partial x} \cdot \frac{\partial N_L^e}{\partial x} + K_y \frac{\partial N_i^e}{\partial y} \cdot \frac{\partial N_L^e}{\partial y} + K_z \frac{\partial N_i^e}{\partial z} \cdot \frac{\partial N_L^e}{\partial z}) dx dy dz \quad (10)$$

$$P_{(L,i)}^e = \iiint_V ss \cdot N_i^e \cdot N_L^e dx dy dz \quad (11)$$

معادله (۷) دستگاهی از معادلات با n معادله و n مجهول را به دست می دهد (n تعداد نقاط شبکه محاسباتی است که ارتفاع هیدرولیکی در آنها مجهول است) که از حل آن مقادیر تقریبی جواب معادله دیفرانسیل مورد نظر در نقاط گرهی محاسبه می شوند.

سپس برای سایر نقاط دامنه با استفاده از درونیابی و به کمک رابطه $\hat{H}^e = \sum_{i=1}^{NPE} H_i(t) N_i(x, y, z)$ مجهولات مورد نیاز را می توان محاسبه کرد. NPE نمایانگر تعداد گره ها در هر المان است.

برنامه های کامپیوتری متعددی بر اساس روابط فوق نوشته شده و به عنوان مدل های تحلیلگر آبهای زیرزمینی مورد استفاده واقع می شوند. تحلیلگری که در این مطالعه مورد استفاده قرار گرفته، نرم افزاری است که توسط غفوری و نورزایی (۱۳۸۲) تهیه و با مثال های متعدد مورد آزمایش

داشت.

۴- روش بهینه‌یابی

برای حل هر مسأله بهینه‌سازی مقید، شبیه آنچه در این مقاله مدنظر است، روشهای متعددی وجود دارد. دسته‌ای از این روشها که روشهای تابع جریمه نامیده می‌شوند و بسیار کارآمد هستند، مسأله بهینه‌سازی مقید را به تعدادی مسأله نامقید تبدیل می‌کنند. بنابراین چنانچه از روشهای تابع جریمه استفاده شود، تعدادی مسأله بهینه‌سازی نامقید حاصل خواهد شد که برای حل آنها می‌توان از هر یک از روشهای بهینه‌سازی نامقید استفاده کرد. در حل هر یک از این مسائل بهینه‌سازی نامقید نیز از روشهایی متفاوت می‌توان بهره برد. چنانچه به این منظور از آن دسته روشهایی که به مشتق تابع بستگی دارند استفاده شود، سرعت حل بالا رفته و روش زودتر همگرا می‌شود. در جریان حل مسأله نامقید نیز وقتی جهت حرکت به سوی نقطه بهینه مشخص شد، گام حرکت باید در این جهت تعیین شود. برای تعیین گام بهینه در جهت مورد نظر، باید از بهینه‌یابی یک بعدی استفاده شود. از میان روشهای بهینه‌یابی یک بعدی نیز روشهایی که در آنها از مشتق تابع استفاده می‌شود کارآمدتر بوده و زودتر گام بهینه را در اختیار قرار می‌دهند که در میان این روشها، روشهای درونیایی را می‌توان نام برد.

در این تحقیق که هدف از آن بهینه‌سازی (کالیبره کردن) مدل آبهای زیرزمینی است، متغیرهای مورد نظر در مدل، ضرائب نفوذپذیری و ذخیره است. با توجه به اینکه برای ضرائب نفوذپذیری و ذخیره نمی‌توان هر مقداری را پذیرفت (به‌ویژه مقادیر منفی)، بنابراین طبیعت مسأله، نوعی مسأله بهینه‌یابی مقید را پیش روی قرار می‌دهد. روشی که برای تبدیل مسأله بهینه‌یابی مقید به یک مسأله بهینه‌سازی نامقید استفاده شد، روش بسط یافته لاگرانژ^۱ است. این روش که جزو روشهای تابع جریمه‌ای محسوب می‌شود

می‌توان از روشهای کمینه‌سازی استفاده کرد. از طرفی برای ضرائب نفوذپذیری K و ذخیره S_s نمی‌توان هر مقداری را در نظر گرفت، به‌ویژه آنکه این ضرائب باید مقادیر مثبتی باشند، بنابراین:

$$0 < K_i \quad (1-14)$$

$$0 < SS_i \quad (2-14)$$

همچنین برای آنکه روند کمینه‌سازی به‌گونه‌ای پیش رود که مقادیر حاصل از کمینه‌سازی برای ضرائب نفوذپذیری و ذخیره، از واقعیت دور نباشند، یک حد بالا نیز برای این ضرائب در نظر گرفته می‌شود. با توجه به توضیحات فوق، ضرائب نفوذپذیری و ذخیره نمی‌توانند هر مقداری داشته باشند، بلکه باید به‌گونه‌ای به‌دست آیند که در قیود زیر صدق کنند:

$$0 \leq K_{Li} < K_i < K_{ri} \quad (1-15)$$

$$0 \leq SS_{Li} < SS_i < SS_{ri} \quad (2-15)$$

که K_{Li} و SS_{Li} حد پائین و K_{ri} و SS_{ri} حد بالایی K_i و SS_i است. قیود فوق را می‌توان به شکل استاندارد زیر نوشت که در کمینه‌سازی استفاده می‌شود:

$$K_{Li} - K_i < 0 \quad (1-16)$$

$$K_i - K_{ri} < 0 \quad (2-16)$$

$$SS_{Li} - SS_i < 0 \quad (3-16)$$

$$SS_i - SS_{ri} < 0 \quad (4-16)$$

با توجه به توضیحات داده شده می‌توان به این نتیجه رسید که مسأله مورد نظر در حقیقت یک مسأله کمینه‌سازی مقید است که در آن هدف، کمینه کردن تابع (۱۳) به شرط قیدهای (۱۶) است. در این بهینه‌یابی، تابع خطای f تابع هدف و K_i و SS_i متغیرهای طراحی می‌باشند. در این تحقیق یک مدل کامپیوتری برای کمینه‌سازی تابع f نوشته شده است. محصول نهایی این مدل ضرائب نفوذپذیری و ذخیره سفره است، به‌گونه‌ای که اگر از این ضرائب، در به‌دست آوردن ارتفاع هیدرولیکی استفاده کنیم، مقادیر به‌دست آمده برای ارتفاع هیدرولیکی با مقادیر واقعی ارتفاع هیدرولیکی سفره حداقل اختلاف را خواهند

نظر گرفته می شوند. اکنون مسأله به شکل مسأله‌ای مقید با قیود مساوی تبدیل شده است.

همان‌طور که قبلاً نیز اشاره شد مسأله مقید به دست آمده را می‌توان با استفاده از روشهای مبتنی بر تابع جریمه به مسأله‌ای نامقید تبدیل کرد. شکل‌های بسیار متنوعی از توابع جریمه به این منظور معرفی شده، که روش مضارب لاگرانژ یکی از مؤثرترین و پر استفاده‌ترین آنها به‌شمار می‌رود. بدون وارد شدن بیشتر به مبحث ریاضی مسأله، تابع لاگرانژی برای $f(x)$ به صورت زیر پیشنهاد می‌شود:

$$A(X, \lambda, r_p) = f(X) + \sum_{j=1}^m [\lambda_j \psi_j + r_p \psi_j^2] \quad (19)$$

که در آن:

$$\psi_j = \max \left[g_j(x), \frac{-\lambda_j}{2r_p} \right] \quad (20)$$

r_p ثابت مثبتی است که پارامتر جریمه نامیده شده و به دلخواه بر اساس ماهیت مسأله مورد نظر انتخاب می‌شود. λ_j ضرایب افزاینده لاگرانژ و ψ تابع جریمه مورد نظر است. عبارت آخر در سمت راست رابطه (19) را عبارت جریمه می‌نامند. می‌توان ثابت کرد که یافتن مقدار بهینه برای رابطه (19)، معادل است با یافتن مقدار بهینه تابع $f(x)$ همراه با قیود $g_j(x) + z_j^2 = 0$ که همان مسأله مورد نظر است.

۴-۲- بهینه‌سازی نامقید

پس از تبدیل مسأله از حالت بهینه‌یابی مقید به تعدادی مسأله بهینه‌یابی نامقید، گام بعدی حل مسأله نامقید به دست آمده است. حل گام به گام مسأله بهینه‌یابی نامقید به روش متریک متغیر (یا روش دیویدون - فلچر-پاول) را می‌توان به صورت زیر توضیح داد:

الف) حل مسأله از یک نقطه آغازین x_1 و یک ماتریس $n \times n$ مثبت معین متقارن H_1 شروع می‌شود. معمولاً H_1 به عنوان ماتریس واحد I انتخاب می‌شود. شماره تکرار $i = 1$ قرار داده شده است.

و روشی نسبتاً سریع در بهینه‌یابی است، به‌علت آنکه از مزیت‌های روش کلاسیک (تحلیلی) مضارب لاگرانژ نیز سود می‌برد بسیار کارآمد و قدرتمند است (Solomatine, 1999). همچنین برای حل قسمت نامقید مسأله از یکی از روشهای بهینه‌یابی نامقید به نام روش متریک متغیر^۱ استفاده شده است. در این روش برای تعیین گام بهینه، از بهینه‌سازی یک بعدی به روش درونیابی درجه دو استفاده شد، که هم از مشتق تابع (به‌صورت غیر مستقیم) استفاده کرده و هم نسبت به درونیابی درجه سه این مزیت را دارد که به‌جای استفاده از چهار نقطه، از سه نقطه در طول حل برای تابع تقریب استفاده شده که روند حل را ساده‌تر می‌سازد. در ادامه، روشهای بهینه‌یابی مورد استفاده در این تحقیق به اختصار توضیح داده می‌شوند. جزئیات بیشتری در باره این روشها را می‌توان در کتابهای بهینه‌یابی ملاحظه کرد (Doherty, 1994, Vanderplaats, 1984) و (Sonnenborg, 2003). ساختار برنامه کامپیوتری که بر همین مبنا به زبان فرترن نوشته شده در شکل ۱ نشان داده شده است.

۴-۱- بهینه‌سازی مقید با قیود نامساوی

یک مسأله بهینه‌سازی مقید با قیود نامساوی به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

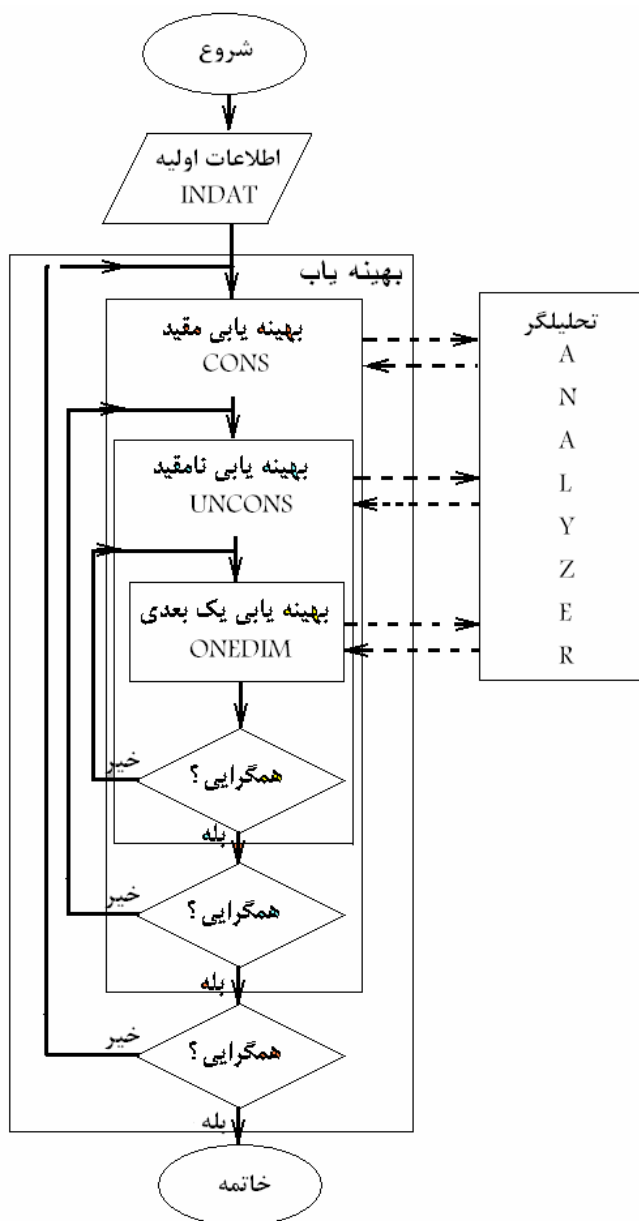
$$x \text{ را به گونه‌ای بیابید که تابع } f(x) \text{ با قیود زیر کمینه شود:} \\ g_j(x) \leq 0 \quad j=1,2,\dots,m \quad (17)$$

اولین گام در این حالت، تغییر دادن این مسأله به مسأله‌ای با قیود مساوی است. این کار با افزودن متغیرهای لنگی z_j^2 به قیود حاصل می‌شود:

$$g_j(x) + z_j^2 = 0 \quad j=1,2,\dots,m \quad (18)$$

با توجه به اینکه بدون در نظر گرفتن علامت z_j^2 مثبت است و برای راحتی کار و با توجه به اینکه قیود مسأله به صورت $g_j \leq 0$ است، متغیرهای لنگی به صورت z_j^2 در

1. Variable Metric



شکل ۱ روندنمای برنامه کالیبره کردن خودکار

ت) نقطه جدید x_{i+1} برای بهینگی آزمایش می شود. اگر x_{i+1} بهینه است، فرآیند تکرار متوقف می شود، در غیر این صورت گام بعدی آغاز می شود.

ث) ماتریس H به صورت زیر به هنگام می شود:

$$H_{i+1} = H_i + M_i + N_i \quad (23)$$

که در آن

$$Q_i = \nabla f(x_{i+1}) - \nabla f(x_i) = \nabla f_{i+1} - \nabla f_i \quad (24)$$

$$M_i = \mu_i^* \frac{S_i S_i^T}{S_i^T Q_i} \quad (25)$$

ب) گرادیان تابع (∇f_i) در نقطه x_i محاسبه شده و برای جستجو به صورت زیر انتخاب می شود.

$$S_i = -H_i \nabla f_i \quad (21)$$

پ) طول گام بهینه μ_i^* را در جهت S_i پیدا کرده (با استفاده از روشهای بهینه سازی یک بعدی که در بخش ۴-۳ توضیح داده می شود) و نقطه جدید به صورت زیر به دست می آید:

$$x_{i+1} = x_i + \mu_i^* S_i \quad (22)$$

تقریب زده شده و μ^* کمینه برای $h(\mu)$ پیدا می‌شود. اگر μ^* به اندازه کافی به μ^* کمینه نزدیک نباشد، مرحله اخیر تکرار می‌شود. در این مرحله برای تقریب $f(\mu)$ از تابع درجه دوم جدید $h'(\mu) = a' + b'\mu + c'\mu^2$ استفاده شده و مقدار جدیدی برای μ^* به دست می‌آید. این روش تا دستیابی به μ^* به اندازه کافی نزدیک به μ^* ادامه می‌یابد.

۵- کاربرد مدل

بخش مربوط به مدل آبهای زیرزمینی یا همان قسمت تحلیلگر برنامه در ابتدا به‌طور جداگانه با استفاده از چند مثال تحلیلی و عددی مورد آزمایش قرار گرفت که همگی حاکی از عملکرد خوب این قسمت از برنامه است (غفوری و نورزایی ۱۳۸۲).

به‌منظور نشان دادن کارایی برنامه بهینه‌یابی تهیه شده برای کالیبره کردن مدل آبهای زیرزمینی، در این قسمت یک مثال ارائه می‌شود. مثال ارائه شده مربوط به سفره محصور فرضی آب زیرزمینی است که در شکل ۲ نشان داده شده است.

ضخامت متوسط سفره برابر ۵۰ متر است. ارتفاع هیدرولیکی نسبت به تراز فوقانی آبخوان در کل نقاط سفره قبل از شروع پمپاژ برابر ۳۰ متر است. شرایط مرزی مدل از دو قسمت تشکیل شده است: ناحیه شمال غرب منطقه به‌عنوان مرز تغذیه کننده با ارتفاع هیدرولیکی ثابت ۳۰ متر در نظر گرفته شده و بقیه مرزهای آبخوان مرز نفوذ ناپذیر است. در این سفره ۵ حلقه چاه حفاری شده که با دبی‌های نشان داده شده در جدول ۱ پمپاژ می‌شوند.

مقادیر حدسی اولیه برای ضرایب نفوذپذیری و ضرایب ذخیره در سه منطقه مجزا در جدول شماره ۲ داده شده است.

این جدول همچنین حدود تغییرات ضرایب مذکور را که در مسائل واقعی بر اساس مشاهدات محلی و قضاوت مهندسی تعیین می‌شوند نشان می‌دهد.

$$N_i = -\frac{(H_i Q_i)(H_i Q_i)^T}{Q_i^T H_i Q_i} \quad (26)$$

ج) شماره تکرار را برابر $i = i + 1$ قرار داده و تمامی محاسبات از گام (ب) به بعد، تا حصول همگرایی تکرار می‌شود.

۴-۳- بهینه‌یابی یک بعدی (روش درونیابی درجه دو)

همان‌طور که در بند (پ) قسمت قبل تشریح شد یافتن مقدار جدید x_{i+1} در هر گام مستلزم یافتن طول گام بهینه μ_i^* در جهت S_i است. برای این کار از روشهای کمینه‌سازی یک‌بعدی استفاده می‌شود. هدف همه روشهای کمینه‌سازی یک‌بعدی، یافتن μ^* یعنی کوچکترین مقدار نامنفی μ است که به‌ازای آن تابع زیر به کمینه موضعی برسد.

$$f(\mu) = f(x + \mu S) \quad (27)$$

بنابراین اگر تابع اصلی $f(x)$ به‌صورت تابع صریحی از x_i ($i=1,2,\dots,n$) قابل بیان باشد، به آسانی می‌توان معادله زیر را برای هر بردار مشخص S نوشت:

$$f(\mu) = f(x + \mu S) \quad (28)$$

در این صورت رابطه زیر را نیز می‌توان برقرار کرد.

$$\frac{df(\mu)}{d\mu} = 0 \quad (29)$$

با حل این رابطه، μ^* بر حسب x و S به دست می‌آید. البته در بسیاری از مسائل واقعی - مانند مسأله مورد نظر در این تحقیق نمی‌توان $f(\mu)$ را به صورت تابعی صریح بر حسب μ بیان کرد یا ممکن است محاسبه آنها مشکل باشد. در این صورت محاسبه مشتقهای جزئی فوق و یافتن μ^* به‌طور صریح مقدور نیست.

در چنین حالتی، از روشهای درونیابی مانند روش درونیابی درجه دوم، برای یافتن μ^* استفاده می‌شود. این روش طول گام کمینه‌سازی μ^* را در دو مرحله محاسبه می‌کند. در مرحله اول، بردار S به‌گونه‌ای نرمالیزه می‌شود که طول گام $\mu = 1$ پذیرفتنی باشد. در مرحله دوم، تابع $f(\mu)$ با یک تابع درجه دوم به شکل $h(\mu) = a + b\mu + c\mu^2$

هیدرولیکی نقاط مختلف آبخوان در محل گره‌های شبکه محاسباتی، یک ماه پس از شروع پمپاژ از ۵ حلقه چاه، بر اساس مقادیری از K و S - که در اینجا مقادیر واقعی نامیده می‌شوند - محاسبه شد.

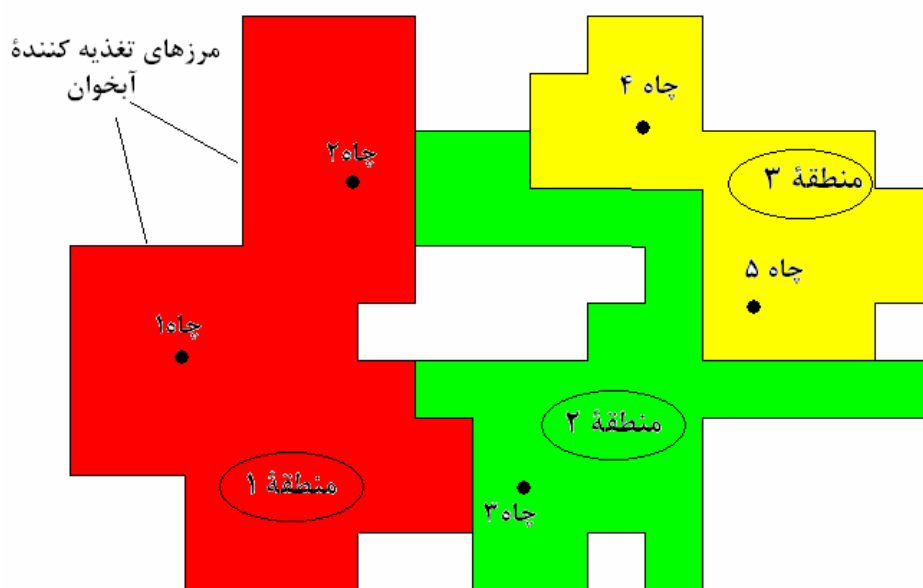
این ارتفاعات هیدرولیکی که در شکل ۴ به صورت گرافیکی نشان داده شده‌اند به جای مقادیر ارتفاع هیدرولیکی مشاهداتی (اندازه‌گیری شده) در برنامه بهینه‌سازی به کار گرفته شدند. واضح است که در حل معکوس مسأله، برنامه بهینه‌سازی باید قادر باشد، ضمن منطبق ساختن ارتفاعات هیدرولیکی مشاهداتی و محاسباتی، همان مقادیر واقعی را نهایتاً برای K و S حاصل نماید.

جدول ۱ مشخصات چاه‌های تولیدی

شماره چاه پمپاژ	شماره گره در شبکه محاسباتی	دبی استخراج (لیتر بر ثانیه)
۱	۱۵	۱۲
۲	۴۷	۹/۵
۳	۷۱	۱۰
۴	۹۷	۸
۵	۱۱۳	۱۱

منطقه مورد نظر، توسط شبکه محاسباتی نشان داده شده در شکل ۳ که دارای ۹۶ المان و ۱۳۳ گره است مدل‌سازی شده است. ابعاد المان‌ها برابر $200m \times 200m$ است.

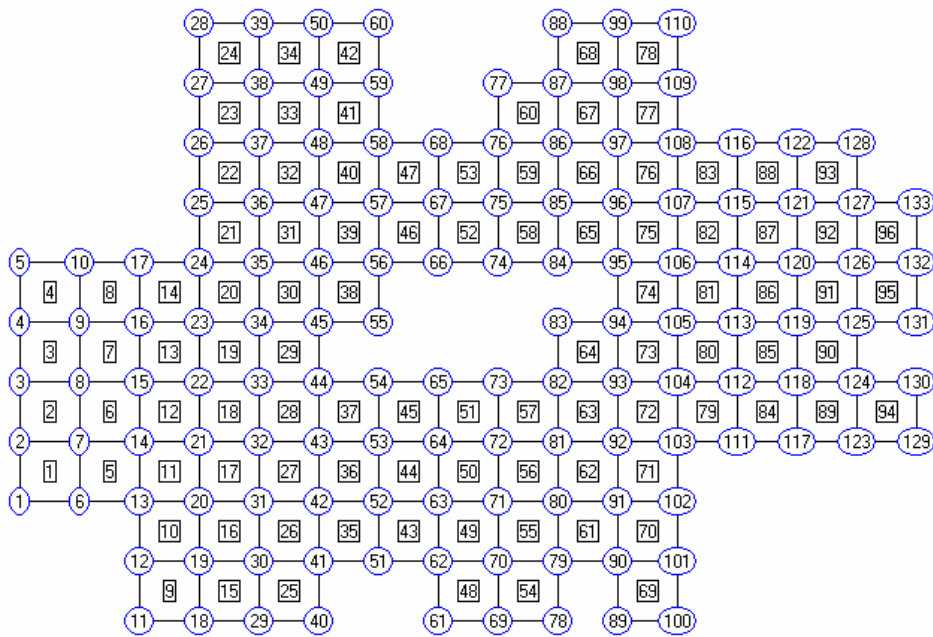
در ابتدا پیش از اجرای برنامه بهینه‌سازی، فقط با اجرای مستقیم بخش شبیه‌ساز (تحلیلگر) برنامه، ارتفاع



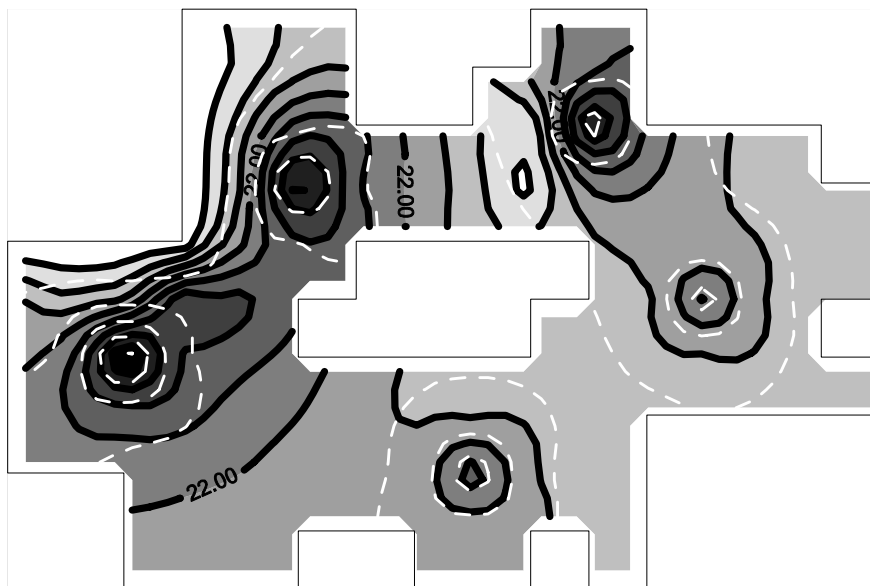
شکل ۲ هندسه کلی آبخوان

جدول ۲ مقادیر حدسی اولیه برای پارامترهای کالیبره در مناطق مختلف

پارامتر منطقه	ضریب نفوذپذیری k_x, k_y (متر بر ثانیه)	ضریب ذخیره S	حدود تغییرات k_x, k_y	حدود تغییرات S
منطقه ۱	$9/5 \times 10^{-6}$	4×10^{-4}	$0 \leq k \leq 5 \times 10^{-5}$	$0 \leq S \leq 1 \times 10^{-3}$
منطقه ۲	$1/15 \times 10^{-5}$	6×10^{-4}	$0 \leq k \leq 5 \times 10^{-5}$	$0 \leq S \leq 1 \times 10^{-3}$
منطقه ۳	$1/50 \times 10^{-5}$	5×10^{-4}	$0 \leq k \leq 5 \times 10^{-5}$	$0 \leq S \leq 1 \times 10^{-3}$



شکل ۳ شبکه محاسباتی اجزای محدود



شکل ۴ مقایسه ارتفاع هیدرولیکی مشاهده‌ای (خطوط ممتد) و محاسباتی (خطوط منقطع) در نقاط مختلف آبخوان پیش از انجام کالیبراسیون خودکار

خودکار مقایسه شده‌اند. تطابق بسیار خوب حاصل بین مقادیر محاسباتی و مقادیر مشاهده‌ای، حاکی از صحت عملیات انجام شده است. برای مشاهده میزان تغییرات پارامترهای کالیبره کننده در طی بهینه‌سازی، مقادیر حدس اولیه این پارامترها و نیز

منحنی‌های میزان مربوط به ارتفاع هیدرولیکی محاسبه شده مثال فوق در شکل‌های ۴ و ۵ نشان داده شده است. شکل ۴ مقادیر h محاسباتی اولیه را در مقایسه با h های مشاهده‌ای نشان می‌دهد که با هم اختلاف نسبتاً زیادی دارند. در شکل ۵ همین مقادیر پس از کالیبره کردن

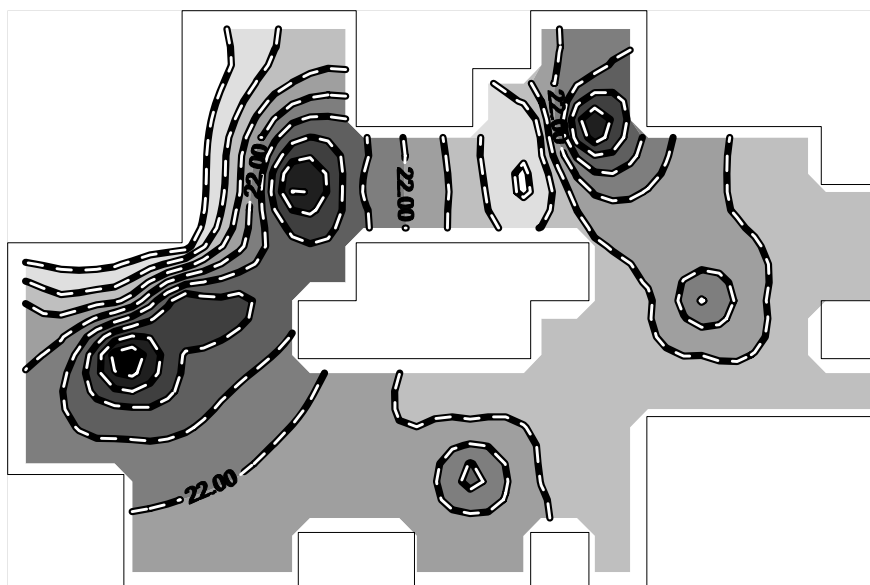
سرعت کالیبره کردن مدل را نسبت به روشهایی مانند روش سعی و خطا بسیار افزایش داده و باعث صرفه‌جویی در وقت و زمان می‌شود.

نتایج حاصل از چند اجرای برنامه با حدس‌های اولیه متفاوت (که نتایج حاصل از آنها در اینجا ارائه نشده‌اند) نشان می‌دهد که با حدس‌های اولیه مختلف، جوابهای متفاوتی را برای پارامترهای کالیبره‌کردن می‌توان انتظار داشت و علی‌رغم تفاوت در این مقادیر، همه این جوابها مدل را به خوبی کالیبره می‌کنند.

مقادیر نهایی آنها پس از پایان عملیات در جدول ۳ نشان داده شده است. همان‌طور که از این جدول پیدا است مقادیر نهایی ضرایب نفوذپذیری و ذخیره، به اندازه قابل قبولی به مقادیر واقعی نزدیک است؛ این موضوع برای ضرایب نفوذپذیری بیشتر محسوس است که ناشی از حساسیت زیاد مدل شبیه‌ساز آبهای زیر زمینی نسبت به تغییرات ضرایب نفوذپذیری است.

۶- بحث و نتیجه‌گیری

کالیبره کردن خودکار مدل‌های کامپیوتری توسط روش‌های بهینه‌یابی روشی کارآمد است که علاوه بر دقت بالا،



شکل ۵ مقایسه ارتفاع هیدرولیکی مشاهداتی (خطوط ممتد) و محاسباتی (خطوط منقطع) در نقاط مختلف آبخوان پس از انجام کالیبراسیون خودکار

جدول ۳ مقایسه مقادیر واقعی، حدسی اولیه و مقادیر نهایی برای پارامترهای کالیبره کننده

ضریب ذخیره S			ضریب نفوذ پذیری k_{xx}, k_{yy} (متر بر ثانیه)			پارامتر منطقه
پس از کالیبره کردن	حدس اولیه	مقدار واقعی	پس از کالیبره کردن	حدس اولیه	مقدار واقعی	
$4/35674 \times 10^{-4}$	4×10^{-4}	5×10^{-4}	$7/84507 \times 10^{-5}$	$9/5 \times 10^{-6}$	$8/0 \times 10^{-5}$	منطقه ۱
$6/23793 \times 10^{-4}$	6×10^{-4}	7×10^{-4}	$1/05839 \times 10^{-4}$	$1/15 \times 10^{-5}$	$1/0 \times 10^{-4}$	منطقه ۲
$5/48301 \times 10^{-4}$	5×10^{-4}	6×10^{-4}	$3/16571 \times 10^{-5}$	$1/50 \times 10^{-5}$	$3/0 \times 10^{-5}$	منطقه ۳

را می‌توان برای حالت‌های عمومی‌تری که در آنها پارامترهای دیگری به‌عنوان متغیرهای کالیبره‌سازی وجود دارند، بسط داد. دبی تولیدی از چاهها، محل‌های احتمالی نشت آب، میزان تبخیر از آبخوان و مانند آن، مثالهایی از این متغیرها است. لذا ایجاد دانش فنی تهیه نرم‌افزارهای کالیبره‌کردن خودکار در کشور را می‌توان از جمله دستاوردهای تحقیق حاضر به‌شمار آورد.

۲- فهرست علائم

b	ضخامت سفره
f	تابع هدف
g	قیود بهینه‌سازی
h	ارتفاع نظیر فشار
H	ارتفاع هیدرولیکی کل
h_c	ارتفاع هیدرولیکی محاسباتی
h_o	ارتفاع هیدرولیکی مشاهداتی
i	شماره گره
k_x, k_y	نفوذپذیری
n	تعداد مجهولات
NPE	تعداد گره‌ها در هر المان
p	فشار آب
Q	دبی آب
q	دبی در واحد طول
r_p	پارامتر جریمه
S_i	بردار جهت
S	ضریب ذخیره
S_s	ضریب ذخیره ویژه
t	زمان
T_x, T_y	ضریب انتقال
x, y	مختصات مکانی
z_j	متغیر لنگی
η	بردار یکه عمود بر مرز
Ψ	تابع جریمه
λ_j	ضرایب افزایشنده لاگرانژ
μ	طول گام
μ^*	طول گام بهینه

دلیل این امر که در بسیاری از تحقیقات مشابه نیز گزارش شده، می‌تواند یکتا نبودن جواب مسأله، داشتن کمینه‌های موضعی متفاوت و نیز ارضا شدن شرط بهینگی در مدل، بدون رسیدن به بهینه نهایی باشد. اگر مسأله‌ای کمینه‌های موضعی متفاوتی داشته باشد با شروع از یک حدس اولیه، مدل کمینه‌ای را که به حدس اولیه نزدیکتر است به‌عنوان جواب به دست می‌دهد. صرف‌نظر از اینکه کدام‌یک از دلایل فوق منجر به چنین نتیجه‌ای شده باشد، این موضوع حائز اهمیت فراوانی در کالیبره‌کردن است.

اگر چه برخی از تحقیقات اخیر، استفاده از روشهای بهینه‌یابی مبتنی بر جستجوی فراگیر را برای برطرف ساختن این مشکل توصیه کرده‌اند، اما تجربه حاصل از کار با نرم‌افزارهایی که بر اساس این‌گونه روشها توسعه یافته‌اند، نشان می‌دهد که هنوز هیچ‌گونه راه‌حل ریاضی قاطعی برای این مشکل وجود ندارد؛ لذا به‌نظر می‌رسد که در حال حاضر تنها چاره عملی برای غلبه بر این مشکل آنست که حدس اولیه پارامترهای کالیبره‌کردن، حتی‌المقدور بر اساس داده‌هایی انتخاب شود که از مشاهدات صحرائی و آزمایش حاصل شده و به مقادیر واقعی نزدیکتر باشند.

موضوع جالب توجه دیگر آن است که در تمامی حل‌های انجام شده، مقادیر ضرایب ذخیره S ، تغییرات بسیار کمی را در طول بهینه‌سازی از خود نشان می‌دهند. این موضوع ناشی از آن است که مدل آبهای زیرزمینی، نسبت به تغییرات ضریب ذخیره حساسیت اندکی دارد. در عوض این مدل به‌شدت تحت تأثیر تغییرات نفوذپذیری بوده و با اندک تغییری در میزان نفوذپذیری، نتایج بسیار متفاوتی از هر مدل آبهای زیرزمینی حاصل خواهد شد. در این صورت طبیعی است که انتظار داشته باشیم کالیبره‌کردن مدل، بیشتر با اصلاح مقادیر نفوذپذیری انجام شود و اصلاح مقادیر ضریب ذخیره چندان در خور توجه نباشد.

با توجه به نتایج رضایت‌بخش حاصل از اعمال روش بهینه‌یابی در کالیبره‌کردن مدل آبهای زیر زمینی، این روش

application of the geostatistical approach to the inverse problem in two-dimensional groundwater modeling: *Water Resources Research*, Vol. 20, No. 7, pp. 1003-1020.

McKinney, D.C. and Lin, M., (1994), "Genetic algorithm solution of groundwater management model", *Water Resour. Res.*, Vol. 30, pp. 1897-1906.

Olsthoorn, T. N. (1995), Effective parameter optimization for groundwater model calibration. *Ground Water* 33, pp. 42-48.

Peck, A., Gorelick, S., de Marsily, G., Foster, S. & Kovalevsky, V. (1988), Consequences of Spatial Variability in Aquifer Properties and Data Limitations for Groundwater Modelling Practice. IAHS Publ. No. 175.

Poeter, EP and Hil M.C., (1997), Inverse Methods: A Necessary Next Step in Groundwater Modeling, *Ground Water*, Vol. 35, No. 2, pp. 250-260.

Poeter, EP and Hil M.C., (1999), UCODE, a computer code for universal inverse modeling, *Computers & Geosciences*, Vol. 25, No. 4, pp. 457-462.

RamaRoa, B.S., LaVenue, M.A., Marsily, Ghislain de, and Marietta, M.G., (1995), Pilot point methodology for automated calibration of an ensemble of conditionally simulated transmissivity fields, 1, Theory and computational experiments: *Water Resources Research*, Vol. 31, No. 3, pp. 475-493.

Solomatine, D. P. (1998) Genetic and other global optimization algorithms—comparison and use in calibration problems. In: *Proc. Third Int. Conf. on Hydroinformatics* (Copenhagen, 24-26 August 1998). Balkema, Rotterdam, The Netherlands.

Solomatine, D. P. (1999) Two strategies of adaptive cluster covering with descent and their comparison to other algorithms. *J. Global Optimiz.* 14(1), pp. 55-78.

Solomatine, D. P., Dibike, Y. B., Kukuric, N. (1999), Automatic calibration of groundwater models using global optimization techniques, *Journal of Hydrological Sciences*, 44(6)

۸- منابع

غفوری، ح.ر. و نورزایی، ج. (۱۳۸۲) مطالعه نحوه نفوذ و توسعه آلاینده‌ها در منابع آب زیر زمینی با استفاده از شبیه سازی کامپیوتری همراه با کاربرد این مدل در یکی از حوضه‌های استان خوزستان، پروژه تحقیقاتی انجام شده برای مدیریت تحقیقات و استانداردهای مهندسی آب سازمان آب و برق خوزستان.

Catcliffe, T.R. (2002), Calibration and Reliability in Groundwater Modeling. *Technometrics*, Vol. 44, Issue 1, pp. 84.

Carrera, J. & Neumann, S. P. (1986) Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions. 1. Maximum likelihood method incorporating prior information. 2. Uniqueness, stability and solution algorithms. 3. Applications of synthetic and field data. *Wat. Resour. Res.* 22(2), pp. 199-210, 222-227, 228-242.

Carrera, J. (1988) State of the art of the inverse problem applied to the flow and solute transport equations. In: *Groundwater Flow and Quality Modelling* (ed. by E. Custodio et al.), 549-583. D. Reidel Publ. Company, ordrecht, The Netherlands.

Doherty, J. (1990), MODINV, Australian Center for Tropical Freshwater Resources, Townsville, Australia, pp. 278.

Dougherty, D.E., Marryott, R.A., (1991), "Optimal groundwater management. Simulated annealing", *Water Resour. Res.*, Vol. 27, pp. 2493-2508.

Doherty, J. (1994), PEST, Watermark Computing, Corinda, Australia, pp. 122.

Haftka, R.T., Gurdal, Z., (1993), "Elements of Structural Optimization", 3rd Ed., Kluwer Academic Publishers.

Hill, M.C., (1992), A computer program (MODFLOWP) for estimating parameters of a transient, three-dimensional groundwater flow model using nonlinear regression: USGS OFR pp. 91-484.

Hoeksema, R.J. and Kitanidis, P.K., (1984), An

Xiang, Y., Sykes, J.F. and Thomson, N.R., (1993), A composite L1 parameter estimator for model fitting in groundwater flow and solute transport simulation. *Water Resources Research*, Vol. 29, No. 6, pp. 1661-1673.

Yeh, W. W. (1986) Review of parameter identification procedures in groundwater hydrology: the inverse problem. *Wat. Resour. Res.* 22(2), pp. 95-108.

Zaadnoordijk, W. J. and Stein, A., (1997) Objective function and parameters. In: *Proc. Model Calibration Conf. of the Dutch Hydrological Society*, 21-38. Special issue no. 2 Nederlandse Hydrologische Vereniging (in Dutch).

Sonnenborg, Torben O.; Christensen, Britt S.B.; Nyegaard, Per; Henriksen, Hans Jørgen; Refsgaard, Jens Christian., (2003), "Transient modeling of regional groundwater flow using parameter estimates from steady-state automatic calibration.", *Journal of Hydrology*, Vol. 273, Issue 1-4, pp. 188.

Vanderplaats, G.N. (1984), "Numerical Optimization Techniques for Engineering Design : with Applications", Colorado Springs CO, McGraw Hill.

Wang, H.F. and Anderson, M.P., (1992) "Introduction to Groundwater Modeling, Finite Difference and Finite Element Methods", Publ. SanFrancisco: W.H. Freeman.